



TITLE:

Theoretical Studies of Quantum  
Electrodynamics for Local Picture of  
Electron Spin and Time-evolution  
Simulation Method of Operators(  
Abstract\_要旨)

AUTHOR(S):

Fukuda, Masahiro

---

CITATION:

Fukuda, Masahiro. Theoretical Studies of Quantum Electrodynamics for Local Picture of Electron Spin and Time-evolution Simulation Method of Operators. 京都大学, 2016, 博士(工学)

ISSUE DATE:

2016-05-23

URL:

<https://doi.org/10.14989/doctor.k19896>

RIGHT:

京都大学	博士（工学）	氏名	福田 将大
論文題目	Theoretical Studies of Quantum Electrodynamics for Local Picture of Electron Spin and Time-evolution Simulation Method of Operators (量子電磁力学における電子スピンの局所描像と演算子の時間発展シミュレーション法の理論的研究)		
<p>（論文内容の要旨）</p> <p>本論文は、量子電磁力学(Quantum ElectroDynamics, QED)に基づく第一原理計算によって相対論的電子状態の局所描像を明らかにする目的に向けた理論的研究に関する研究成果をまとめたものであり、2部6章から構成される。第1部（1～3章）では電子スピンに関する局所描像の理論的研究について、第2部（4～6章）ではQEDにおける演算子の時間発展シミュレーション法の研究について報告されている。</p> <p>第1章では、定常状態の分子内のスピントルクに関する局所描像の議論を行った。場の量子論から導かれる電子スピン角運動量密度演算子の運動方程式によると、電子スピンの働くトルクには2種類あり、従来の量子力学において定義されるスピン角運動量を時間変化させる「スピントルク」と、場の量子論から導かれる電子のカイラリティの空間的分布に起因する「ツェータ力」というトルクが局所的に生じている。時間に依存しない定常状態では電子スピンにはスピントルクが働いていないという従来の相対論的量子力学の考え方に反し、実際にはスピントルクは存在するがツェータ力と拮抗することで定常な状態を実現しているという描像が場の量子論によって予言される。この力学的描像を調べるため、4成分相対論的電子状態計算を行い、得られる波束を場の量子論の状態ケットとして用いて局所物理量を計算し、局所描像を可視化した。この結果から、これまで量子力学で考慮されていなかったツェータ力の効果が、分子内では大きな寄与をもつことが明らかになり、その効果がもたらす物性への影響を調べる新たな取り組みへの道を切り開いた。また、空間対称性に関する議論から、ツェータ力のポテンシャルであるツェータポテンシャルの分布は分子の回転対称性と同じ対称性を持ち、分子の鏡映面に対して符号が逆転することを理論的に示し、ベンゼン分子に対する数値計算によりその性質を確認した。さらに、より大きな系に対するスピンに関する局所物理量の計算を可能にするために、4成分相対論計算よりも計算コストが少なく計算速度も速い2成分相対論計算による電子状態を用いた局所物理量計算手法の定式化と計算精度の比較を行った。ツェータポテンシャルの2成分計算は4成分計算の結果とよい一致が見られた。また、分子軌道ごとの局所物理量の分布から、軌道エネルギーにはほとんど影響を与えない相対論的な相互作用が局所描像に対しては強い影響を与えることが確認された。</p> <p>第2章では電子の永久電気双極子モーメント（EDM）の存在下におけるスピンドायナミクスについての理論研究を行った。EDMの観測は時間反転対称性の破れを直接確かめるだけでなく、素粒子の標準模型の拡張理論の検証に重要な役割を果たすと注目されている。近年盛んに行われている重原子を含む極性分子を用いる電子EDM観測実験ではスピンの歳差運動を利用してEDMの値を推定する。本研究ではこのスピンの歳差運動を調べる際に必要とされる極性分子（YbF, ThO, BaF）内のEDM有効電場を相対論的電子状態計算により求め、大きなEDM有効電場が生じる原因を局所的な観点から明らかにした。さらに、場の量子論に基づくスピンの運動方程式より導かれるEDMに起因する局所的なスピントルクの観点からスピンの歳差運動を考察した。</p> <p>第3章では、量子スピン渦理論に基づくスピンホール効果の力学的局所描像についての</p>			

京都大学	博士（工学）	氏名	福田 将大
<p>理論的研究を行った。一般相対性原理に基づく「量子スピン渦理論」より導かれる電子の全運動量にはスピンの渦度が現れる。量子力学では期待値を計算する際に全空間で積分を行うため、スピンの微分で書かれたスピンの渦度はゼロとなり、スピンの渦度が運動量の要素として現れることはこれまで注目されていなかったが、スピン角運動量密度が空間的に分布する局所領域では無視できない。このスピンの渦度に関する理論研究として、スピンホール効果の量子スピン渦理論に基づく力学的な局所描像を提案した。「印加された電場によって流れる電流がスピン軌道相互作用によってスピン流に変換される」というスピンホール効果の従来の考え方は、「印加された電場によって電子スピン渦が生成する」と説明されることを示した。また、量子力学的な第一原理計算から得られる定常電流下における1次元炭素鎖の相対論的な電子状態を用いてスピンの局所描像のデモンストレーションを行った。その結果、バイアス電圧が加わった後に定常状態に至る過程において、電子は動的運動量を得るだけでなく、原子核付近にスピン渦度を生じることが第一原理計算によっても確認された。</p> <p>第4章では、量子電磁力学における演算子の時間発展シミュレーションの手法と近似法の考案とプログラムコード開発を行った。まず、物理量演算子の計算に必要な2つの生成・消滅演算子の積の形で表されている励起演算子の時間発展方程式を理論的に導出した。シミュレーションの初めの段階として、電子の自己エネルギープロセスや遅延ポテンシャルの影響は考慮せず、ボルン-オッペンハイマー近似の下での数値シミュレーションを行った。その結果、水素原子内においてQED特有の電子と陽電子の対生成消滅に起因する電荷密度の高速振動を確認した。</p> <p>第5章では、前章のシミュレーションに電子の自己エネルギープロセスを考慮した数値シミュレーションを行った。電子の自己エネルギープロセスとは電子が自ら放出した光子を再吸収する過程のことであり、その影響によって本来の電子よりも質量が増大したと解釈される。シミュレーションの結果、確かに自己エネルギープロセスを含めたことにより、電子の質量エネルギーに依存する電荷密度の高速振動の周期が短くなることが確認された。</p> <p>第6章では、遅延ポテンシャルの影響を考慮したQEDに基づく時間発展シミュレーションについて議論した。遅延ポテンシャルまで考慮する場合には静電ハミルトニアンを用いる量子化学計算には現れなかった2つの積分項を計算する必要がある。これらの積分項は解析的に計算が困難であり、また被積分関数が激しく振動するため通常の数値積分法では計算の収束が困難となる問題がある。これらの積分項の数値積分を効率的に行うために、大浦と森によって提案された二重指数関数型数値積分公式を用いる手法を考案した。これにより、遅延ポテンシャルの影響を含んだQEDに基づく第一原理計算の実現への道を切り開いた。</p>			

## (論文審査の結果の要旨)

本論文は、量子電磁力学に基づく第一原理計算によって相対論的電子状態の局所描像を明らかにする目的に向けた理論的研究に関する研究成果をまとめたものであり、得られた主な成果は次のとおりである。

第1章では、定常状態の分子内のスピントルクに関する局所描像について議論されている。従来の量子力学では議論することのできない局所的なスピンの働くトルクについて、場の量子論の枠組みで定義される力学的な局所物理量を用いて議論している。4成分相対論的電子状態計算から得られる波束を場の量子論の状態ケットとして用いることにより、定常状態のベンゼン分子内においても局所的なスピントルクとそれと拮抗するツェータ力と呼ばれるトルクが生じているという力学的局所描像が示されている。また、分子軌道ごとの局所物理量の分布から、軌道エネルギーにはほとんど影響を与えない相対論的な相互作用が局所描像に対しては強い影響を与えることが示されている。さらに、2成分相対論的電子状態計算による波束を用いた局所物理量の計算手法の定式化とさまざまな手法に対する計算精度の比較がなされており、これらの成果によって、より大きな系に対するスピンに関する局所物理量の計算が可能になることが期待される。

第2章では、上記のスピンの局所描像の議論を電子の永久電気双極子モーメントが存在する場合にまで拡張し、EDMに起因する局所的なスピントルクの観点からスピンの歳差運動が考察されている。

第3章では、一般相対性理論に基づく「スピン渦理論」より導かれる電子の全運動量に現れるスピンの渦度に着目し、スピン角運動量密度の空間分布が重要となるスピンホール効果への応用が基礎理論的な立場から提案されている。

第4章から第6章では、量子電磁力学における演算子の時間発展シミュレーションの手法と近似法の考案について議論されている。物理量演算子の時間発展に必要な2つの生成・消滅演算子の積の時間発展方程式が理論的に導出されている。電子の自己エネルギープロセスや遅延ポテンシャルの影響を考慮せず、ボルン-オッペンハイマー近似の下で数値シミュレーションを行った結果、水素原子内においてQED特有の電子と陽電子の対生成消滅に起因する電荷密度の高速振動が現れることを示している。さらに、自己エネルギープロセスを含むシミュレーションにより、電子の質量エネルギーに依存する電荷密度の高速振動の周期が短くなることが示されている。また、遅延ポテンシャルまで考慮したシミュレーションに向けて、遅延ポテンシャルを含む計算に現れる振動積分を効率的に計算するため、二重指数関数型数値積分公式を用いる手法が提案され、量子電磁力学に基づく第一原理計算の実現に向けた重要な取り組みと認められる。

以上、本論文は、量子電磁力学における電子スピンの局所描像と演算子の時間発展シミュレーション法の理論的研究について議論されたものであり、学術上、實際上寄与するところが少なくない。よって、本論文は博士(工学)の学位論文として価値あるものと認める。また、平成28年4月22日、論文内容とそれに関連した事項について試問を行って、申請者が博士後期課程学位取得基準を満たしていることを確認し、合格と認めた。